



TITLE:

界面ダイナミックス(計算物理,第
41回物性若手夏の学校(1996年度))

AUTHOR(S):

太田, 隆夫

CITATION:

太田, 隆夫. 界面ダイナミックス(計算物理,第41回物性若手夏の学校
(1996年度)). 物性研究 1996, 67(2): 141-150

ISSUE DATE:

1996-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/95947>

RIGHT:

界面ダイナミックス

お茶の水女子大学理学部 太田隆夫

1 はじめに

界面とは二つの相異なる状態の境界のことである。相転移における新しい秩序状態の出現や非平衡系でのパターン形成のダイナミックスでは、界面の運動に着目した記述がしばしば、有効な方法論となる。

講義では、相転移現象の基本的な方程式である時間依存ギンツブルグ・ランダウ方程式 [1] と非平衡開放系のモデルである反応拡散方程式 [2] から界面の運動方程式を導出する。この結果から、非平衡系の界面は、予想をはるかに超えた多彩な振る舞いを示すことがわかるであろう。

2 界面ダイナミックスの考え方

界面ダイナミックスは界面の自由度のみをあらわに取り込んで系の時間発展を追いかける方法である。このように、多数の自由度の内から現象の本質に係わっている自由度のみを取り出し、記述する方法は物理学で伝統的に用いられてきた。たとえば、気体の運動はミクロなレベルではボルツマン方程式に支配されるが、十分大きな空間スケールでは流体力学方程式が便利でかつ適切である。ボルツマン方程式から流体力学方程式への移行においては、密度、エネルギー、運動量に対する時間発展方程式を書き下す。これらは保存量であるから、平均値のまわりでずれが生じたとき、その空間変化が長波長であればあるほどもとの一様な値に戻りにくい。すなわち、大きな空間スケールではゆっくりとした変数になる。その他の自由度が、十分速く緩和するときこれらを消去して、保存量のみによるマクロな記述は正当化される。

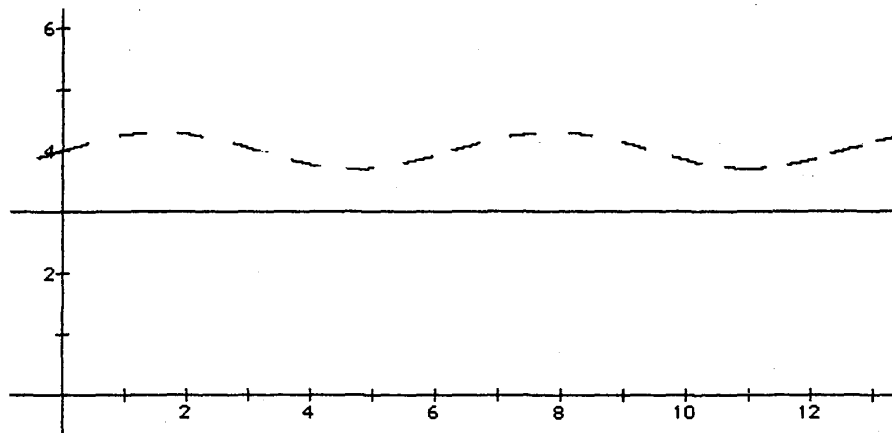


図 1

界面ダイナミックスも同様な指導原理に基づいている。図1のように、無限に広がった2次元系に非一様な安定な構造が出現したとしよう。平らな界面の位置を実線で示してある。系が一様で並進対称性をもっているなら界面はどこに置いてもよい。つまり、界面の位置は任意パラメータである。点線のように界面が曲がったとしよう。他に変形を促進する要素がなければ、界面は元のまっすぐな形にもどろうとするが、変形の波長が大きければ大きいほど、もどるのに要する時間は長くなる。これはまっすぐな界面を一様にずらしても、もとの位置にもどらない（もどる必要がない）ことの反映である。このような自由度を中立モードとよぶことがある。他の自由度が長波長の極限で有限の緩和時間をもつなら、時間スケールが明確に分離され、速く緩和する自由度は界面の運動に追随するとして消去することができ、界面の運動に注目した記述が有効である。

3 時間依存ギンツブルグ・ランダウ方程式

相転移でもっとも基本的な概念は秩序変数であろう [1]。高温の高対称性をもつ状態ではゼロ、相転移温度 T_c 以下の対称性が低下した状態では有限の値をとるように定義される。相転移のダイナミックス、すなわち、場としての秩序変数 $S(\vec{r}, t)$ の時間発展のモデルとして簡単で、かつ、重要なのはギンツブルグ・ランダウ方程式である。

$$\frac{\partial S(\vec{r})}{\partial t} = \epsilon^2 \nabla^2 S + f(S) \quad (1)$$

関数 $f(S)$ を

$$f(S) = (1/2)S(T_c - T - S^2) \quad (2)$$

とおく。後でわかるように、 ϵ は界面の厚さを与える。以後、空間1次元で考える。

一様平衡解は $T > T_c$ では $S = 0$ 、 $T < T_c$ では $S = \pm\sqrt{T_c - T}$ である。最初、高温側の $S = 0$ の状態にあった系を、時刻 $t = 0$ に T_c 以下に急冷すると秩序変数 S はいかなる振る舞いをするであろうか。図2は $T_c - T = 1$ とおいて (1) を数値計算した結果である。時間とともに $S = \pm 1$ の領域が形成され、その境界が互いに近づいてきて対消滅することによって、それぞれの領域が大きくなっていく。

このような時間発展を定量的に理解するには (1) から界面方程式を求める必要があることは直ちに、納得できるであろう。これを次の節で行なう。

4 1次元界面方程式

有限区間 $0 < x < L$ で考え、境界条件として $\partial S / \partial x = 0$ ($x = 0, L$) を課す。図3のように、 $x = x_1$ と $x = x_2$ に界面があり、そこからはなれたところでは $S \approx \pm 1$ となっている非一様解があるとしよう。 ϵ は界面間距離 ℓ に比べて十分小さいと仮定する。

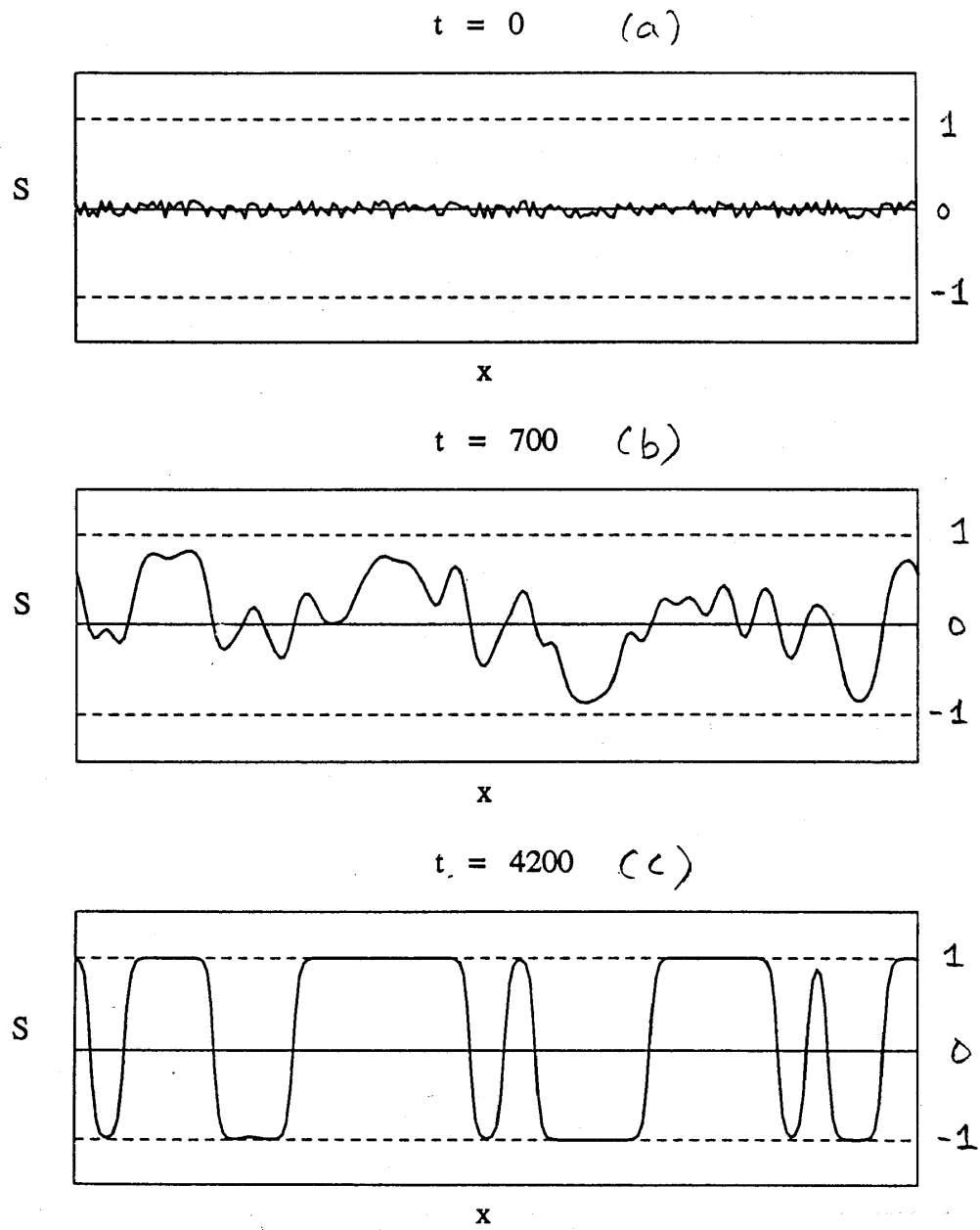


図 2

このような状況では非一様解 $\tilde{S}(x)$ は無限に広がった系の孤立した界面解 $\bar{S}(x)$ の重ね合せで近似できる。

$$\tilde{S}(x) = \bar{S}(x - x_1) - \bar{S}(x - x_2) - 1 \quad (3)$$

$\bar{S}(x)$ は

$$\bar{S}(x) = \tanh\left(\frac{x}{2\epsilon}\right) \quad (4)$$

で与えられる。これから ϵ が界面の厚さを表わすことがわかる。非一様解 $\tilde{S}(x)$ の線形安定性をみるため

$$S(x, t) = \bar{S}(x - x_1(t)) - \bar{S}(x - x_2(t)) - 1 + b(x, t) \quad (5)$$

と置き、(1)式に代入する。(5)では界面が動くことを想定して、 x_1 と x_2 を時間の関数とした。 b に関して1次までで

$$\frac{\partial b}{\partial t} = -\mathcal{L}b + \dot{x}_1 \bar{S}'_1 - \dot{x}_2 \bar{S}'_2 + f(\tilde{S}) - f(\bar{S}_1) + f(\bar{S}_2) \quad (6)$$

$$\mathcal{L} = -\epsilon^2 \frac{d^2}{dx^2} - f'(\tilde{S}) \quad (7)$$

ここで、 \dot{x}_1 は時間に関する微分、 \bar{S}' は変数に関する微分を表わす。また、 $\bar{S}_1 = \bar{S}(x - x_1(t))$ などと略記した。

ここでの目的は界面の位置 x_1 と x_2 の従う方程式を求めることである [3]。以後、 x_1 の運動に注目しよう。 $x \approx x_1$ のところでは $|1 + \bar{S}_2| \ll 1$ であるから、(6)を簡単化できる。特に、線形演算子 \mathcal{L} は

$$\mathcal{L}_0 = -\epsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - f'(\bar{S}_1) \quad (8)$$

で置き換えられる。

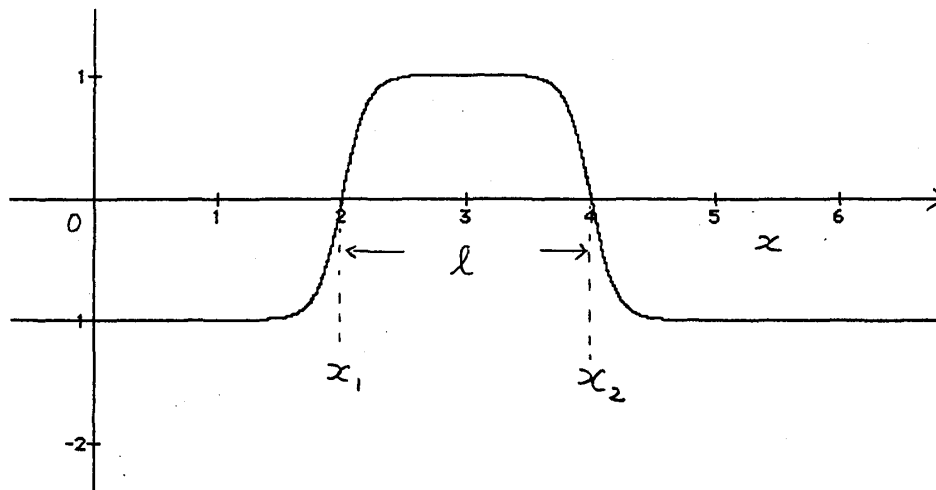


図 3

容易に確かめられるように、 \mathcal{L}_0 はゼロ固有値をもち、固有関数は $d\bar{S}_1/dx$ である。これは孤立した一個の界面の並進が中立モードであることに起因している。ゼロ固有状態があると b に関して非斉次な方程式 (6) は、一般に、時間 t に比例して増大する解（永年項）をもつ。そのため、 b が十分小さいとして1次までとった方程式 (6) 自身が正当性を失う。それゆえ、永年項をもたないためには非斉次項がゼロ固有関数と直交していなければならない。これを非斉次方程式 (6) の可解条件という。界面の位置 x_1 と x_2 に対する方程式はこの可解条件から得られるのである。最終的な表式は

$$\dot{x}_1 = 12\epsilon \exp\left[-\frac{x_2 - x_1}{\epsilon}\right] \quad (9)$$

となる。 x_2 に対する式は (9) の右辺にマイナス符号をつければよい。従って、 $x_2 - x_1 = \ell$ に対して

$$\dot{\ell} = -24\epsilon \exp[-\ell/\epsilon] \quad (10)$$

となる [3]。

$\epsilon \ll \ell$ であるから (10) の右辺は非常に小さい。しかも、 $\exp[-\ell/\epsilon]$ のような ϵ 依存性をもっていることは、(1) 式を単純に ϵ のべきで摂動展開しても界面間相互作用 (10) は求まらないことを意味している。 $\dot{\ell} < 0$ であることから、 x_2 と x_1 にある界面間には引力が働き、非常にゆっくりとではあるが、互いに近づいてくることがわかる。十分近づくと、方程式 (1) の右辺第1項によって、空間的に一様になろうとして、 $S \approx 1$ の領域は消え去り、系全体が $S = -1$ の一様状態となって落ち着く。

5 反応拡散系のパルス

前節でみたように、ギンツブルグ・ランダウ方程式の界面は対消滅を起こす。これは純粋に散逸的な系では一般的に成り立つ性質であると信じられていた。しかし、最近、グレイ・スコット (Gray-Scott) モデル [4] とよばれる次の反応拡散方程式でその反例が見つかった [5]。

$$\frac{\partial u(\vec{r})}{\partial t} = D_u \nabla^2 u - uv^2 + a(1 - u) \quad (11)$$

$$\frac{\partial v(\vec{r})}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + uv^2 - (a + b)v \quad (12)$$

方程式 (11)、(12) の解はさまざまな興味深い時空間パターンを示すことが計算機シミュレーションで発見されている ([5]、[6])。まず、1次元で伝搬するパルス解が存在する。(11)、(12) は変換 $x \rightarrow -x$ に対して不変であるから、右に伝搬するパルス解が存在するなら、同時に、左に伝搬する解も存在し、それらの形は互いに鏡映の関係になければならない。また、動かない局在解は中心対称のはずである。

図4は伝搬するパルス二つを正面衝突させたときの様子である。実線が v 、点線が u を表わす。パラメータは $D_u = 2 \times 10^{-5}$, $D_v = 1 \times 10^{-5}$, $a = 0.025$, $b = 0.055$ と選んである。

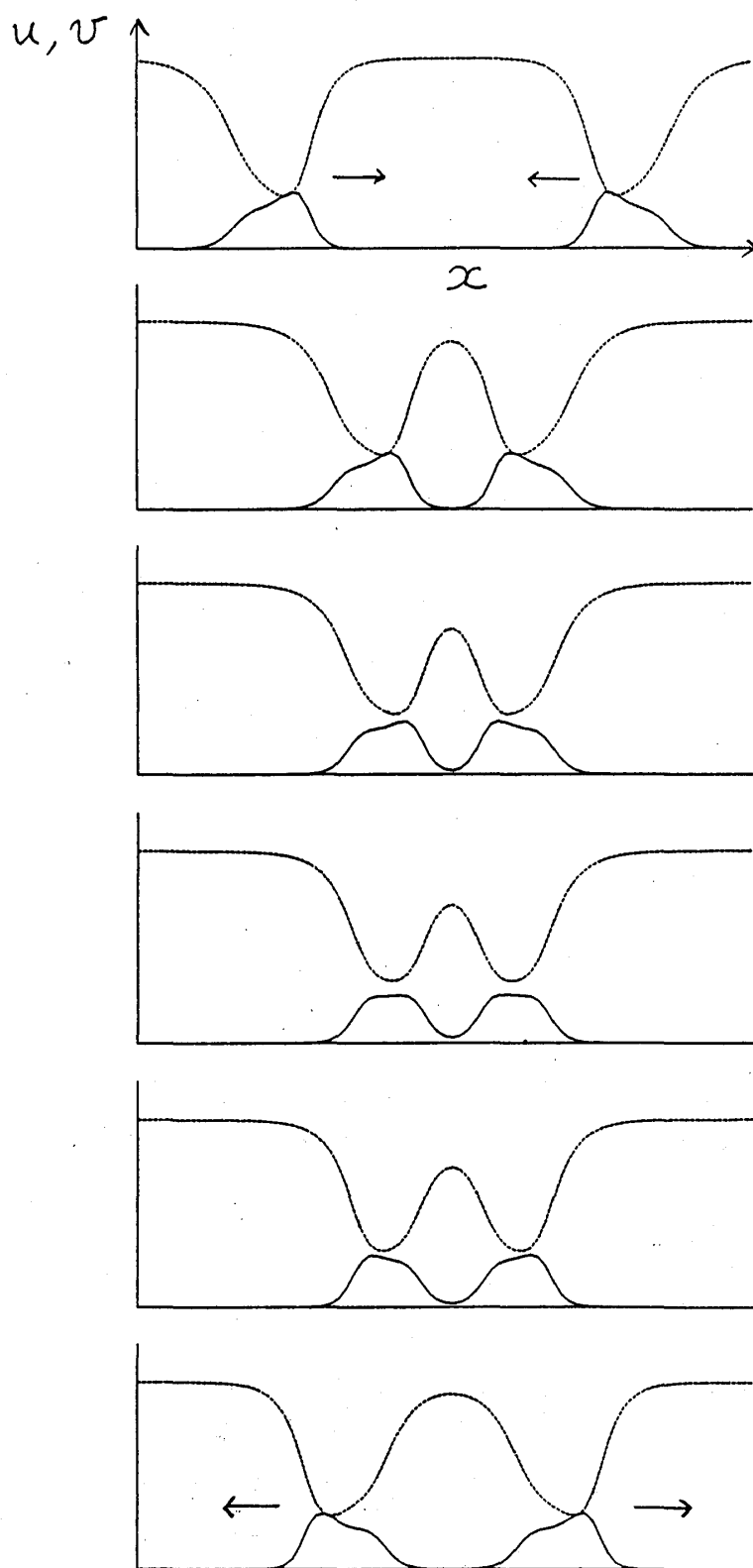


図 4

二つのパルスが接近したのち停止し、形を変え、離れ去っていく。これが実現するのは a と b の限られた範囲でのみ可能である。

6 界面の弾性的な衝突

グレイ・スコットモデルのパルスが衝突において消滅せず、弾性的に振る舞うことが数値シミュレーションでわかった。何故、このようなことが起こるのであろうか。界面の衝突にもどって考えてみよう [7]。

つぎのような反応拡散系を考える。

$$\tau \epsilon \frac{\partial u}{\partial t} = \epsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u) - v \quad (13)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + u - \gamma v \quad (14)$$

ここに、 $\tau, \epsilon, D, \gamma$ は正定数である。関数 $f(u)$ は 3 節と本質的に同じであり、

$$f(u) = u(1-u)(u-a) \quad (15)$$

($0 < a < 1/2$) の形を仮定する。界面方程式の導出ではさらに簡単化した

$$f(u) = -u + H(u-a) \quad (16)$$

を使用する。関数 $H(x)$ は $x > 0$ で $H(x) = 1$ 、 $x < 0$ で $H(x) = 0$ と定義される。方程式 (13)、(14) は $\epsilon \ll D$ のとき、ペローソフ・ジャボチンスキー反応のモデルである [8]。

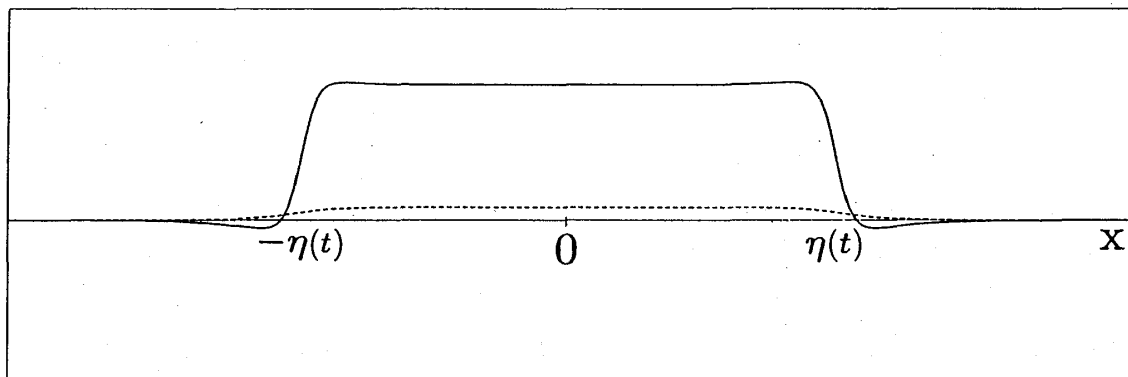


図 5

さて、図5のように $x = \pm\eta$ に界面があるような非一様解を考え、 η に対する方程式を求めよう。 $\epsilon \ll D$ では u の空間変化に比べて v の変化はゆるやかである。そのため、 ϵ のスケールに着目しているとき、(13) の v を界面での値 v_I で置き換えてよい。一個の界面が動く速度 $\dot{\eta}$ は、その結果

$$\frac{\dot{\eta}\tau}{[(\dot{\eta}\tau)^2 + 4]^{1/2}} = 1 - 2a - 2v_I \quad (17)$$

となる。(17) では v_I が未知である。これは (14) を解くことによって決定できる。 v の空間変化のスケールである $O(\sqrt{D})$ では (13) で $\epsilon = 0$ と置いてよい。(16) を使って u を η で表わし、(14) に代入すると

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \beta v + H(\eta - x)H(x + \eta) \quad (18)$$

を得る。ここに、 $\beta = 1 + \gamma$ である。(18) を解き、 $v_I = v(\eta, t)$ とおいて (17) に代入すると η に対する閉じた方程式が得られる。界面ダイナミックスのこのような定式化については [9]、[10] を参照されたい。

第4節で述べたギンツブルグ・ランダウ方程式の界面とは質的に異なる方程式であることに注意しよう。(10) ではオーダー ϵ のごく短距離で引力相互作用が働いた。一方、(13)、(14) では、方程式 (18) の構造からわかるように、上の短距離相互作用の他に、 v を媒介にして $x = \pm\eta$ の界面間に時間遅れの相互作用が働く。その形は界面の動きと v の時間変化の比であるパラメータ τ に依存する。 τ が十分大きいとして、遅れの効果を摂動的に取り入れて (18) を解くと、界面方程式は最終的に

$$m(\eta)\ddot{\eta} + \frac{1}{2}(\tau - \tau_c - \tau_c e^{-2\kappa\eta})\dot{\eta} + g\dot{\eta}^3 = \alpha + \frac{1}{\beta}e^{-2\kappa\eta} \quad (19)$$

となる [7]。ただし、 $\tau_c = 1/\sqrt{D\beta^3}$ 、 $g = (\beta^2\tau_c^3 - \tau^3)/16$ 、 $\alpha = 1 - 2a - 1/\beta$ 、 $\kappa = \sqrt{\beta/D}$ である。慣性項 $\ddot{\eta}$ は時間遅れ相互作用のために現われ、質量 $m(\eta) > 0$ は η に弱く依存する関数である。

$g > 0$ の範囲で考えよう。 τ_c は特別に重要な意味をもつ。 $\alpha = 0$ とし、孤立した界面があるとする。すなわち、 $\eta \rightarrow \infty$ 。このとき (19) は $\tau > \tau_c$ では動かない界面が $\tau < \tau_c$ では、左右いずれかに動き出すことを表わしている。しかも、 τ が τ_c に近いところでは、この速度はいくらでも遅くなる。この分岐は文献 [11] で最初に議論された。

(19) において α が負でないとき界面間相互作用は斥力であることに注意しよう。従って、図5のような2つの界面の衝突を上的狀況で考えると、界面が近づいたところでは (19) の慣性項と右辺相互作用項が支配的になり、弾性衝突が起こると期待できる。実際、(19) を数値的に解き、容易にこれを確かめられる。

結論として、 $\alpha \approx 0$ 、 $\tau \approx \tau_c$ では界面は対消滅することなく、弾性的衝突を起こす。 τ の値が小さくしていくと界面の速度が大きくなるため、弾性的な跳ね返りが起こらず、消滅する。

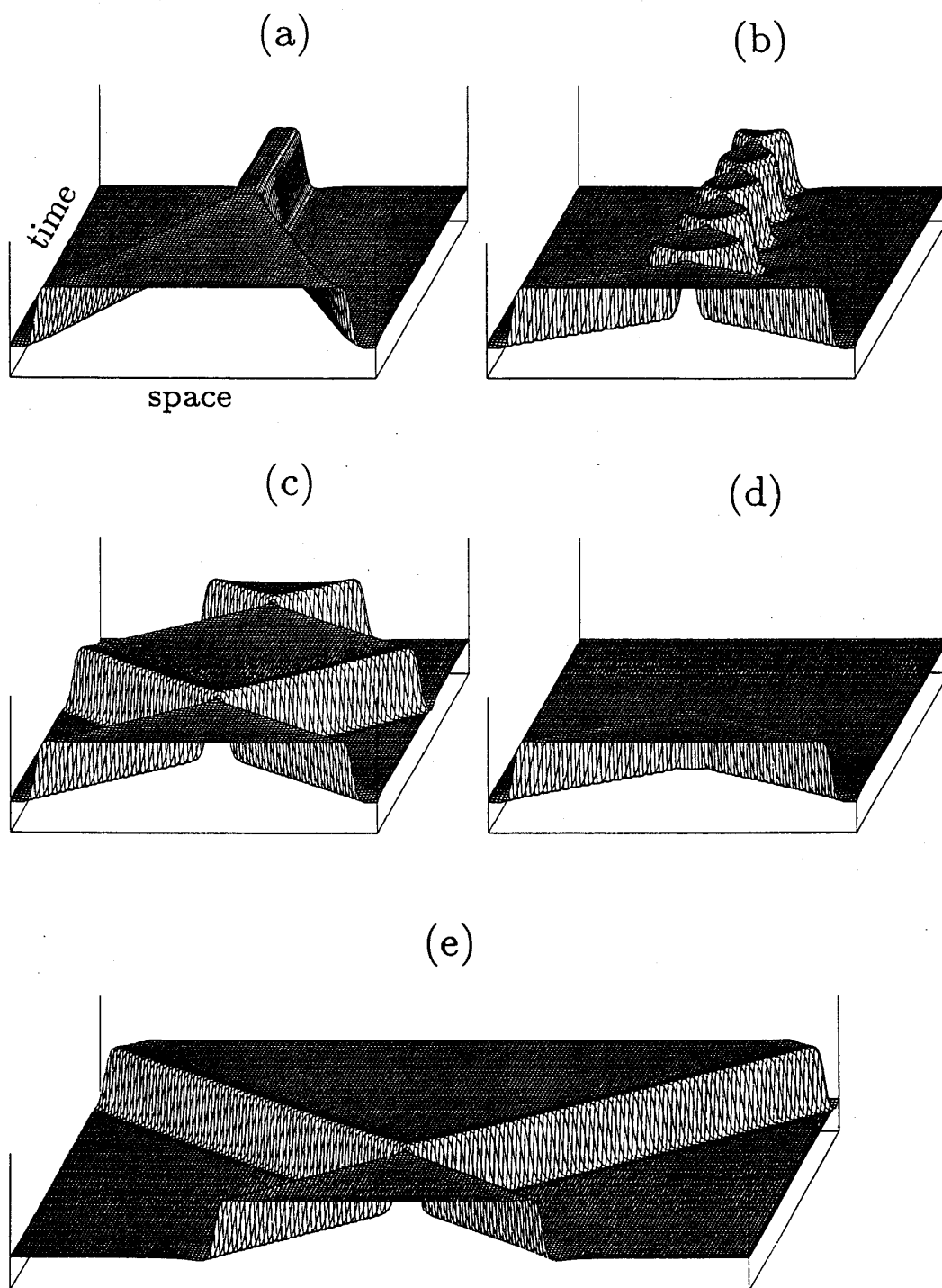


図 6

図6は、このことを、元の方程式(13)、(14)、(15)の計算機シミュレーションで確認したものである [7]。 $D = 1$ 、 $\epsilon = 0.05$ 、 $a = 0.25$ と置き、(a) $\tau = 0.07$ 、 $\gamma = 10$ (b) $\tau = 0.055$ 、 $\gamma = 10$ (c) $\tau = 0.05$ and $\gamma = 72/7$ (d) $\tau = 0.048$ 、 $\gamma = 72/7$ である。(e) は (c) と同じパラメータで系の大きさを2倍にした場合である。

7 おわりに

相転移のモデル方程式と反応拡散方程式を例にとり界面ダイナミックスを説明した。界面の厚さが、系の特徴的長さに比べて十分小さい極限では、時間スケールも明確に分離できるため、界面ダイナミックスが体系的に定式化できる。

空間的に局在したドメインが衝突によって個性を保持する例は可積分系のソリトンが有名である。また、可積分系に散逸（摩擦）項を付け加えたときのソリトンの振る舞いに関する研究もなされている。しかし、ここで示したような純粋に散逸的な系での弾性的衝突はこれまで予想されていなかった。可積分系でのソリトンは、特殊な場合を除いて、すべて空間1次元であるのに対し、非平衡散逸系では、空間2次元以上でも同じような弾性的振る舞いが起こることが特徴である。

非平衡散逸系の局在ドメインの相互作用と運動は未開拓であり解明すべき多くの問題が残されている。

参考文献

- [1] J. D. Gunton et. al, *Phase Transitions and Critical Phenomena* Vol 9 (1982).
- [2] E. Meron, *Phys. Rep.* **218** (1992) 1.
- [3] S. Ei and T. Ohta, *Phys. Rev.* **E50** (1994) 4672.
- [4] P. Gray and S. K. Scott, *Chem. Engng. Sci.* **39** (1984) 1087.
- [5] V. Petrov, S. K. Scott and K. Showalter, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **347** (1994) 631.
- [6] K. Krisher and A. Mikhailov, *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 3165.
- [7] T. Ohta and J. Kiyose, *J. Phys. Soc. Jpn.* (submitted).
- [8] J. J. Tyson and P. C. Fife, *J. Chem. Phys.* **73** (1980) 2224.
- [9] P. C. Fife, *J. Math. Anal. Appl.* **54** (1976) 497.
- [10] J. J. Tyson and J. P. Keener, *Physica* **32D** (1988) 327.
- [11] Y. Nishiura and M. Mimura, *SIAM J. Appl. Math.* **49** (1989) 481.